

# 国防基础科研核科学挑战专题

## “百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域

### 第二批项目申报指南

依据《国防科工局财政部关于印发〈国防基础科研核科学挑战专题管理暂行办法〉的通知》(科工技[2016]884号)、《国防科工局财政部关于国防基础科研核科学挑战专题“十三五”项目建议书(第一批)的批复》(科工技[2016]545号)、《国防科工局关于印发〈国防基础科研核科学挑战专题“十三五”指南(第二批)〉的通知》(科工技[2017]191号)等文件,以及《国防基础科研核科学挑战专题“百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域实施管理细则》,“百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域依托中物院高性能数值模拟软件中心实施,中心组织开展了本领域的项目指南编制工作,现正式发布,启动本领域第二批项目申请立项工作。

本领域的总体目标是:面向百亿亿次计算,前瞻性凝练和解决当前数值模拟计算方法随网格分辨率的持续提升所呈现的计算精度下降和健壮性差、计算方法和高效能实现不适应于未来高性能计算机体系结构的基础科学问题和关键技术,形成重大基础创新研究成果,培养高水平基础研究人才队伍,为我国武器物理数值模拟软件平台与国产高性能计算机协同发展、最终具备科学预测能力奠定坚实基础。

本领域围绕高精度高分辨率计算方法体系研究、百亿亿次高效能实现研究、高性能并行计算方法体系研究、高性能多尺度计算方法研究四个方向部署若干项目，领域实施第一期为5年，即2016年-2020年。

本次发布的指南为领域第二批指南（[www.caep-scns.ac.cn](http://www.caep-scns.ac.cn)—>挑战专题），共12项，拟支持15个项目。项目的研究周期为2017年-2019年，每个项目支持力度为80万元-150万元。

#### 受理要求：

1. 自指南发布之时至**2017年3月31日（周五）17:00**受理挑战专题参研团队自荐表；
2. 请前往<http://www.caep-scns.ac.cn/tzzt.php>，进入挑战专题网络管理平台实名注册并登录后，在线填写并提交参研团队自荐表；
3. 请下载生成的参研团队自荐表，打印纸制材料（一式三份），团队负责人签字，所在单位盖章后，邮寄至：北京市海淀区花园路六号软件中心，挑战专题领域管理办公室收（可简写“管理办”），010-61935800（邮戳日期截止4月7日前）。

#### 特别提示：

1. 参研团队自荐表与指南相关性要求请仔细阅读指南下方的备注内容；每人限提交一份电子版自荐表；
2. 为了准确理解挑战专题本领域定位，请您认真阅读《国防基础科研核科学挑战专题“百亿亿次计算科学的计算方法

与高效能实现”领域实施管理细则》;

3. 咨询热线: 于翠影 010-61935588

赵 帅 010-61935800

技术支持: 赵 媛 010-61935701

国防基础科研核科学挑战专题

“百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域

第二批项目指南

“百亿亿次计算科学的计算方法与高效能实现”领域管理办公室

2017年3月

# 目 录

方向一：高精度高分辨率计算方法体系研究 .....	1
TZZT2017-A1: 凝聚炸药爆轰驱动弹塑性金属的欧拉方法研究 .....	1
TZZT2017-A2: 可压缩多相流高精度数值方法研究 .....	2
TZZT2017-A3: 非线性热传导问题高精度高效计算方法研究 .....	3
TZZT2017-A4: 粒子输运问题的数值方法研究 .....	4
方向二：百亿亿次高效能实现研究 .....	6
TZZT2017-B1: 模式驱动的十亿亿次并行算法 .....	6
TZZT2017-B2: 超大规模病态离散代数系统的高效求解方法 .....	7
TZZT2017-B3: 十亿亿次计算原位可视分析并行扩展绘制算法 .....	8
TZZT2017-B4: 面向百亿亿次计算与浮点字长的匹配性研究 .....	8
方向三：高性能并行计算方法体系研究 .....	10
TZZT2017-C1: 复杂结构动态断裂与破坏的高精度方法与高效并行算法 .....	10
TZZT2017-C2: 典型飞行器再入过程宽频随机振动高效计算方法研究 .....	11
方向四：高性能多尺度计算方法研究 .....	12
TZZT2017-D1: 核相关材料腐蚀行为相场建模与高效算法研究 .....	12
TZZT2017-D2: 凝聚相炸药燃烧爆炸过程的数值模拟方法研究 .....	13

## 方向一：高精度高分辨率计算方法体系研究

### TZZT2017-A1：凝聚炸药爆轰驱动弹塑性金属的欧拉方法研究

#### 研究目标：

针对亟待提高数值模拟凝聚炸药爆轰驱动金属介质运动过程的置信度这一工程应用要求，本项目研究高精度的多物质流动欧拉方法，解决目前存在的炸药爆轰爆速与爆压计算误差较大、爆轰反应区空间分辨率不足、物质大变形模拟能力较弱、物质界面分辨率较差等问题，为凝聚炸药爆轰物理精密建模以及金属弹塑性本构模型精密建模提供数值支持。

#### 研究内容：

##### （1）凝聚炸药爆轰过程高精度欧拉方法研究

针对凝聚炸药爆轰的复杂形式状态方程以及强刚性化学反应源项，发展低耗散、强稳定的离散格式；针对凝聚炸药爆轰的狭小化学反应区宽度，发展高精度欧拉计算方法。

##### （2）弹塑性金属大变形运动高精度欧拉方法研究

针对弹塑性金属的复杂形式状态方程以及复杂形式弹塑性本构模型，发展高精度、低耗散的离散格式；针对可压缩介质的大变形运动，发展能够兼容变形梯度约束条件的高精度计算格式。

##### （3）高分辨率物质界面捕捉技术研究

针对物质界面的非定常运动，发展高分辨率的捕捉技术与离散格式；针对物质界面两侧不同的物质性质，发展适应流-固耦合边界条

件的处理技术。

#### (4) 凝聚炸药爆轰驱动金属过程的数值模拟与实验验证

通过发展的高精度多物质流动欧拉方法数值模拟凝聚炸药爆轰驱动金属过程，与已有炸药爆轰驱动实验结果对比，并与现有炸药爆轰驱动程序计算结果对比，从而获得更精确的炸药爆轰驱动金属的物理图像及物理规律，为进一步进行凝聚炸药爆轰物理精密建模以及金属弹塑性本构模型精密建模提供数值支持。

**支持项目数：** 1 项

**备注：** 必须覆盖 (1)、(2)、(3) 研究内容，(4) 可选。

### **TZZT2017-A2: 可压缩多相流高精度数值方法研究**

**研究目标：**

针对可压缩多相混合流动精密化数值模拟需求，分析不同相之间的相互作用机制，建立能够描述可压缩颗粒多相流的可计算物理模型，发展具有保正性质的健壮的高精度多相流数值方法。解决现有混合模拟只有均匀混合假设的不足，实现对不同混合形态的模拟能力。

**研究内容：**

目前武器物理混合模拟仍采用均匀混合假设，对于可能存在的颗粒混合采用了人为经验近似处理。针对目前武器物理可压缩颗粒混合问题模拟能力的不足，开展可计算物理建模和数值方法研究。具体内容包括：

(1) 研究能够描述可压缩颗粒多相流混合过程的可计算物理模型;

(2) 研究具有保正性质的高精度可压缩多相流数值方法;

(3) 利用已有实验开展物理模型和计算方法的验证研究。

支持项目数: 1 项

备注: 覆盖全部研究内容。

### **TZZT2017-A3: 非线性热传导问题高精度高效计算方法研究**

#### **研究目标:**

针对核爆炸物理中非线性热传导或非平衡扩散的数值模拟, 解决现有辐射迁移计算中离散方法精度较低和计算效率较低的问题, 设计出能保持方程的基本数学特性的离散格式和迭代加速求解方法, 以及能兼顾计算稳定性和精度的本性并行计算方法, 避免出现难以适时完成计算、破坏守恒性、损失精度、甚至导致计算完全失真等问题。

#### **研究内容:**

针对武器物理、激光聚变和核爆炸物理中具有强源和强非线性热传导等过程的数值模拟, 研究适用于高温、多尺度和复杂环境等极端情形的高精度高效数值方法。具体内容包括:

(1) 针对高温、多尺度和复杂环境等极端条件下的非线性热传导问题, 分析确定现有离散格式和迭代方法可能存在的问题, 以及引起这些问题的原因; 开展相关的计算方法的验证研究, 设计典型的反映应用问题特征的数学模型, 验证计算方法对实际问题计算的适应性



与有效性;

(2) 研究求解非线性退化热传导方程的高精度高效计算方法, 对不同数值方法进行比较分析, 设计出能避免热波传播速度计算不准确和求解效率较低等问题的计算方法, 使其适用于含辐射能流的球爆炸过程的数值模拟;

(3) 提炼反映实际问题关键特征的辐射与物质能量传输的数学模型, 设计高阶离散格式和高效的非线性迭代求解方法, 以及能兼顾计算稳定性和精度的本性并行计算方法, 并对数值方法进行理论分析;

(4) 针对高温、多介质且计算区域几何复杂的热传导问题, 研究适用于网格极度扭曲且传导系数强间断等情形的计算方法, 设计能在非匹配网格上保持主要物理特性的高精度离散格式。

**支持项目数: 3 项**

**备注:** 其中研究内容(1)为必选, (2) - (4) 至少选一条。

#### **TZZT2017-A4: 粒子输运问题的数值方法研究**

**研究目标:**

分析确定的粒子输运问题精密化数值模拟中现有计算方法的不足, 设计出改进的高效高精度的数值方法, 解决实际求解中存在的计算量极大和射线效应等难点问题, 并验证计算方法对实际问题计算的适应性与有效性。

**研究内容:**

针对实际的粒子输运问题数值模拟中计算量极大和存在射线效应等瓶颈问题，研究高效高精度的数值方法。具体内容包括：

(1) 针对粒子输运方程自变量个数多导致计算量极大的问题，研究离散纵标方程组快速高效的计算方法；

(2) 针对离散纵标方法存在射线效应的问题，研究并设计可抑制射线效应等非物理现象的输运离散格式；

(3) 基于典型的粒子输运基准模型，对离散格式和加速求解方法进行验证，并开展相应的计算方法理论研究。

**支持项目数：** 1 项

**备注：** 至少覆盖 (1)、(2) 中的一项，必须覆盖 (3)。

## 方向二：百亿亿次高效能实现研究

### **TZZT2017-B1：模式驱动的十亿亿次并行算法**

#### 研究目标：

针对结构与非结构网格典型数值模拟应用在十亿亿次计算面临的可扩展性问题，建立并行计算模式，通过模式驱动的高效数据通信方法、负载平衡方法研究，解决复杂典型数值模拟应用并行计算模式与十亿亿次系统体系结构的匹配性问题。

#### 研究内容：

(1) 模式驱动的十亿亿次量级数据通信方法与性能评价。包括：针对典型数据通信模式，例如：网格影像区交换、逐元归约、粒子迁移等，分析其影响性能的应用特征并量化建模；模式驱动的匹配十亿亿次系统的高效率低开销通信算法；研究可定量评估通信算法的性能评价模型等；

(2) 面向典型多物理耦合应用的十亿亿次多约束多目标负载平衡算法研究。包括：针对典型多物理场耦合模拟的不同物理过程之间负载特征存在的显著差异、以及物理过程耦合通信的特征，建立多物理耦合负载模型；基于负载模型，设计同时在单物理过程内和多物理过程间保证负载平衡、极小化通信的负载平衡算法；

支持项目数：2项

备注：(1) - (2) 至少选一条。

## **TZZT2017-B2: 超大规模病态离散代数系统的高效求解方法**

### **研究目标:**

面向结构力学数值模拟应用,研究数值模拟中超大规模线性方程组的高效求解。通过具有最优计算复杂度和良好并行可扩展性的快速并行数值算法研究,在计算规模和并发度扩大千倍的情况下,解决这类系统求解面临的算法复杂度和并行可扩展性问题。

### **研究内容:**

(1) 数百亿至千亿自由度结构力学离散线性系统特点分析。结构力学数值模拟过程中,除了实际工程计算构型复杂之外,还涉及非线性接触、多场耦合、热传导等多种因素。这些因素均对于离散线性系统的结构和性质具有非常重要的影响。需要分析工程力学数值模拟中的相关因素对于离散线性系统的影响,进行应用特征建模与分析,形成相关的基准测试集。

(2) 数百亿至千亿自由度结构力学离散线性系统高效求解算法研究与设计。由于工程力学数值模拟中涉及的线性系统严重病态,系数矩阵是一类典型非  $M$  矩阵,现有的求解算法难以有效求解,甚至很难收敛。面向十亿亿次计算中千亿自由度结构力学模拟,针对该类问题非结构网格离散系统面临的求解效率问题,研究具有最优算法复杂度和良好并行可扩展性的求解算法,主要研究应用特征驱动的并行可扩展算法构造与理论分析等。

**支持项目数:** 1 项

**备注:** 须涵盖 (1) - (2)。

## **TZZT2017-B3: 十亿亿次计算原位可视分析并行扩展绘制算法**

### **研究目标:**

针对十亿亿次原位可视分析应用中的结构/非结构网格数据绘制性能瓶颈和可扩展瓶颈,面向众核计算机体系结构特征,研究满足数十万核至百万核原位可视分析需求的低内存开销、高效可视化绘制方法及并行算法,解决十亿亿次计算规模下的原位并行可视化绘制问题。

### **研究内容:**

(1) 面向十亿亿次数值计算应用,研究可覆盖结构/非结构网格类型数据的低内存开销、高效可视化绘制算法,绘制算法可适应数值计算的数据剖分方法,并避免或减少绘制期的中间数据生成;

(2) 面向多核众核体系架构的计算与可视化运行时高效协同方法;

(3) 面向数十万核至百万核的高可扩展并行绘制和并行图像合成算法、以及适于应用级原位处理的数据分析与绘制优化算法,包括:适于原位的数据特征分析和抽取、原位数据压缩和约简等。

**支持项目数:** 1 项

**备注:** 须涵盖 (1) - (3)。

## **TZZT2017-B4: 面向百亿亿次计算与浮点字长的匹配性研究**

### **研究目标:**

面向武器物理、能源和材料等重大行业典型应用的百亿亿次计

算，针对高性能计算机系统浮点字长对应用程序可信度的影响，研究定量刻画其影响的模型和方法，探索极小化其影响的策略，建立百亿亿次计算与浮点字长的匹配性理论，解决百亿亿次数值模拟应用中由浮点字长带来的可信性问题。

### **研究内容:**

针对实际数值模拟应用中所需的若干典型运算，研究：

- (1) 百亿亿次计算场景下字长对这些典型运算误差的影响；
- (2) 分析误差传播和误差扰动对计算精度的影响；
- (3) 建立百亿亿次计算与浮点字长的匹配性理论。

研究内容需包括下面所列典型运算中的至少 4 类运算：内积计算、向量校正、稀疏矩阵向量乘积、以及几何光路模型中的点线相交、线线相交、线面相交等。

**支持项目数:** 1 项

**备注:** 须涵盖 (1) - (3)。

### 方向三：高性能并行计算方法体系研究

#### **TZZT2017-C1：复杂结构动态断裂与破坏的高精度方法与高效并行算法**

##### **研究目标：**

极端载荷（如爆炸驱动）下材料与结构破坏模式多样、变形高度局域化，使得这类材料与结构的冲击破坏数值模拟极具挑战。其中，网格扭曲、裂纹扩展、随机接触、尺度相关性是制约材料断裂与破坏工程数值模拟精度的关键因素，也是长期以来的固体力学计算方法领域的挑战性课题。本课题旨在以工程问题的迫切需求为牵引，及时吸收和采纳该领域相对成熟的先进数值方法及其最新成功改进，依托大规模并行技术，实现先进算法的工程实用化，提升工程结构断裂与破坏的可信预测能力。

##### **研究内容：**

（1）面向三维任意多裂纹损伤演化的高精度数值模拟，发展三维弹塑性大变形（大位移）扩展有限元理论与方法。

（2）面向结构解体破坏过程的高保真数值模拟，发展高精度无网格粒子类方法以及对这一类方法的最近成功改进。

（3）面向实际工程应用需求，发展相应的大规模并行算法。

**支持项目数：1 项**

**备注：**院外申请可针对（1）（3）或（2）（3）进行申请，鼓励指南条目全覆盖。

## **TZZT2017-C2: 典型飞行器再入过程宽频随机振动高效计算方法研究**

### **研究目标:**

飞行器再入大气层时，处于自由飞行状态，结构将承受较强的脉动压力作用，产生宽频随机振动，对关键装置和部件的安全可靠性产生重要影响。正确分析这种宽频随机载荷作用下的结构振动响应问题对飞行器性能评估和响应预测具有重要意义，并可为后续复合环境和多场分析奠定基础。针对这一典型的自由体宽频随机振动问题，本项目旨在联合优势研究团队，开展目标飞行器宽频振动响应评估的高效求解算法与高分辨率数值模拟技术研究。

### **研究内容:**

(1) 考虑刚体-弹性变形耦合的再入飞行器宽频随机振动高效数值求解方法。从频域和时域两个方面开展研究，输入为相关脉动压力载荷，响应输出特征量包含结构位移、速度、加速度响应以及结构应力响应等；

(2) 发展相应的刚-柔耦合大规模并行求解技术；

(3) 发展随机振动大规模并行求解技术。

**支持项目数: 1 项**

**备注: 院外申请须覆盖全部条目。**



## 方向四：高性能多尺度计算方法研究

### TZZT2017-D1：核相关材料腐蚀行为相场建模与高效算法研究

#### 研究目标：

认识核相关材料库存或服役条件下的腐蚀机理，预测宏观腐蚀行为和性能变化，需要从根本上探索大体系中辐照、温度、气氛和应力等多重复杂因素综合作用下的微结构长时间演化过程和规律。现有分子动力学模拟方法能较精确模拟材料微结构演化，但是模拟时空尺度有限，无法研究材料的宏观腐蚀行为和性能变化；动力学蒙特卡罗方法可以有效扩展时间尺度，但是不能精确地在模型中引入腐蚀过程中的微结构演化行为。介观相场模拟方法时空尺度大，可以显式描述相变界面特征和微结构演化行为，但要研究、预测材料宏观腐蚀行为和性能变化仍需改进相场模型考虑多重因素影响，发展高效算法进一步扩大模拟的时空规模。综上，本项目拟实现材料腐蚀行为的介观相场建模及验证，拟突破相场模拟的大体系、长时间高效数值算法，获得材料腐蚀微结构长时间演化的过程和机理，支撑材料宏观腐蚀行为和性能变化的评估和预测。

#### 研究内容：

(1) 耦合第一性原理、分子动力学方法计算腐蚀相场模型相关的能量、动力学信息和力学性质，为相场建模提供参数输入。

(2) 考虑辐照条件、温度、腐蚀气氛以及内应力和外应力等多重因素的综合影响，构建材料腐蚀多相场模型并进行验证。

(3) 针对大体系、长时间腐蚀相场模拟，研究离散数值格式和高效数值算法。

(4) 研究多重因素影响下的材料腐蚀行为，包含腐蚀机理研究以及腐蚀行为和性能变化的评估与预测。

**支持项目数：** 1 项

**备注：** 项目需要覆盖 (1) - (4) 全部研究内容。

### **TZZT2017-D2：凝聚相炸药燃烧爆炸过程的数值模拟方法研究**

**研究目标：**

针对凝聚相炸药燃烧爆炸过程的高精度数值模拟需求，建立能够描述弹药低速燃烧和快速爆轰过程的多介质可压缩反应流体动力学数学模型，并设计适用于该模型的高效高分辨率数值计算方法，实现固体炸药、多组份气体爆轰产物和金属壳体耦合相互作用的数值模拟，解决弹药在意外刺激下安全性评估和反应等级预测难题。

**研究内容：**

(1) 研究凝聚相炸药低速燃烧和快速爆轰的炸药反应和物质运输过程，建立包含不同阶段反应模型的多介质可压缩反应流体数学模型；

(2) 基于以上数学模型研究适用于三维非结构网格的高效高分辨率数值模拟方法和多介质界面捕捉算法，并完成计算方法的有效性验证；

(3) 设计适用于极端条件（高温、高压、高密度比）下包含多种实际状态方程的高稳定求解方法。

**支持项目数：** 1 项

**备注：** 项目需要覆盖 (1) - (3) 全部研究内容。